CROATICA CHEMICA ACTA

Adresa redakcije **Address of the Editorial Board**

CROATICA CHEMICA ACTA
19 Marulićev trg, Zagreb, Croatia, Yugoslavia

REDAKCIJSKI ODBOR — EDITORIAL BOARD

Glavni urednik — Editor-in-Chief
Siniša Marčić

Pomoćni urednici — Assistant Editors
Dunja Cvitaš, Tomislav Cvitaš i Marijan Pribanić

Tajnik — Secretary
Dina Keglević

Pomoćni tajnik — Assistant Secretary
Vera Mikulčić

Članovi odbora — Members

M. Biruš, M. Eckert-Maksić, B. Grabarić, L. Klasinc, Z. Konrad, Ž. Kućan, Z. B. Maksić, B. Matković, Z. Meić, M. Orhanović, I. Piljac, N. Pravdić, V. Pravdić, M. Proštenik, V. Rapić, E. Reiner, I. Ružić, Vl. Šimeon, Z. Štefanac, V. Šunjić, B. Tamhina i N. Trinajstić (Zagreb)

REDAKCIJSKI SAVJET — ADVISORY BOARD

K. Deželić, K. Balenović, A. Bezjak, A. Despić, Gj. Deželić, M. Deželić, I. Filipović, V. Gall, D. Grdenić, H. Iveković, B. Kamenar, M. Karšulin, O. Lahodny-Šarc, B. Lovrečak, D. Maljković, P. Mildner, M. Mirnik, M. Proštenik, M. Randić, P. Strohal, D. Sunko, V. Škarić i M. Tišler

CONTENTS

ORIGINAL SCIENTIFIC PAPERS

GENERAL AND THEORETICAL CHEMISTRY

R. Blinc: The Soft Mode in H-Bonded Ferroelectrics Revisited 7

S. Bratos: Infrared Band Shapes of van der Waals and Hydrogen Bonded Liquids. Comparison of Band Shaping Mechanisms 15

C. A. Chatzidimitriou-Dreismann and E. Lippert: A Statistical Description of Molecular Dynamical Processes in Liquids. Application to FIR Absorption Spectroscopy 23

Lj. Golič and I. Leban: The Crystal Structure of Ammonium Hydrogen Maleate 41

E. Grech, Z. Malarski and L. Sobczyk: $[NH\cdots N]^+$ Hydrogen Bonds in Crystalline Salts of Monoaza- and Diaza-bicyclo[2.2.2]octane 47

P. L. Huyskens and G. G. Siegel: Dipole Moments of H-Bonded Complexes 55

R. Janoschek: The Electrostatic Model in the Theory of H-Bonds 75

M. Kertesz, J. Koller and A. Ažman: Application of the Intermediate Exciton Formalism to H_2 Molecular Chains 85

A. Kivinen, H. Auvinen, J. Huuskonen and K. Väkiparta: Hydrogen Bonding Properties of Pharmaceuticals. Part 1. 2,3,4,5-Tetraiodo, Tetrabromo and Tetrachloropyrroles as Medium-Strong Proton Donors 91

J. Kroon and J. A. Kanters: The Two Fundamental H-Bond Types in Acid Salts Displayed in the Dimorphs of Potassium Hydrogen Tartronate . 99

J.-M. Leclerq, P. Dupuis and C. Sándorfy: Possibility of a Double Well Potential in the Proton Bridge of Visual Pigments and Bacteriorhodopsin 105

D. Lucas, L. J. Allamandola and G. C. Pimentel: Matrix Isolation Infrared Spectra of Hydrogen Halide and Halogen Complexes with Nitrosyl Halides 121

Y. Maréchal: Quantitative IR Spectroscopy of H-Bonds: Intensities of ν_s Bands 129

D. J. Millen: Microwave Spectroscopic Investigations of Hydrogen-Bonded Dimers and the Directional Character of Hydrogen Bonds 133

A. Novak: Intermolecular Hydrogen Bond Vibrations 147

I. Olovsson: The Electron Density of the Hydrogen Bond 171

W. J. Orville-Thomas and H. Ratajczak: Matrix Isolation and Molecular Orbital Studies of Water 191

C. N. R. Rao, S. Ganguly and H. R. Swamy: Vibrational Spectroscopic Studies of Phase Transitions in Organic Molecular Crystals and Dicarboxylic Acids 207

N. D. Sokolov: Mode Coupling in Molecular Complexes 223

J. C. Speakman and K. W. Muir: Basic Salts with Very Short Hydrogen Bonds; the Crystal Structure of α-Picoline-*N*-oxide Hemihydrochloride Sesquihydrate (Dunlop's Salt) 233

E. Spinner: Vibrational Spectroscopy of Compounds with Very Short Hydrogen Bonds. The Aqueous Bisformate Ion. Comparison with Two Solid Salts, and Some Comments on Broad OH Absorption Continua 249

K. S. Siddiqi, P. Khan, S. Khan, M. R. H. Siddiqi and S. A. A. Zaidi: Transition Metal Complexes of α-Naphthylamine Dithiocarbamate 271

M. B. Todorović, I. J. Gal, I. D. Paligorić and V. M. Radak: Self-diffussion of Cd^{++} Ions in Hydrated CdX Zeolite 287

T. M. Šuranji and N. B. Milić: Hydrolysis of the Thorium(IV) Ion in Magnesium, Calcium, Strontium and Barium Chloride Media 295

I. Gutman: Topological Properties of Benzenoid Systems. X. Note on a Graph-Theoretical Polynomial of Knop and Trinajstić 309

Z. Kralj, N. Paulić, N. Raos and Vl. Simeon: Copper(II) and Cobalt(II) Complexes with L-Threonine and L-allo-Threonine: Potentiometric and CD--Spectroscopic Study 337
B. Džonova-Jerman-Blažić and N. Trinajstić: Application of Reduced Graph Model to the Enumeration of Kekulé Structures and Conjugated Circuit of Benzenoid Hydrocarbons 347
I. Gutman: The Number of Kekulé Structures in Conjugated Systems Containing a Linear Polyacene Fragment 371
I. Gutman and B. Mohar: Some Observations on the Topological Resonance Energy of Benzenoid Hydrocarbons 375
S. Heimer and Dj. Težak: Precipitation of Tannic Acid with Triton T-X-705 383
N. Pavković, M. Marković and B. Kojić-Prodić: Spontaneous Precipitation in the System Uranyl(2+)nitrate — Potassium Hydroxide — Phosphoric Acid — Water 393
N. Pavković, M. Marković and B. Kojić-Prodić: Identification and Characterization of Alkaline Uranyl(2+) Phosphates 405
T. A. Mastryukova, A. B. Uryupin, M. I. Kabachnik, M. Orlov and D. Jeremić: Reaction of Diphenyldiazomethane with Phosphorus Monothioacids . . 413

CHEMICAL SYNTHESIS

J. J. Herak, M. Kovačević and B. Gašpert: Ring Expansion of Thiazolidine and Nucleophilic Substitution in *N*-Acil Derivatives of 6-Thia-3,8-diazabicyclo[3.2.1]octan-2-one 327

ANALYTICAL CHEMISTRY

S. Turina and N. Blažević: Determination of Silver in Aluminium by Thin Layer Chromatography 315
S. Luterotti and V. Grdinić: Collection of Traces of Cadmium(II)-Ion on 2(3)--Alanine-*N*,*N*-Diacetic Acid Cellulose 321

ORGANIC SYNTHESIS

G. Snatzke, A. Konowal, A. Sabljić, N. Blažević and V. Šunjić: Circular Dichroism of Optically Active 1,4-Benzodiazepines 435
V. Škarić and V. Turjak-Zebić: Geometrical Isomers in the 2-Amino-(2-Hydroxy)cyclohexane-1,3-, -1,4-, -1,5-, and -1,6-dicarboxylic Acids Series 457

NOTES

GENERAL AND THEORETICAL CHEMISTRY

Lj. D. Arsov, M. Froelicher, M. Froment et A. Hugot Le-Goff: Применение уравнений Френеля в статистическом анализе эллипсометрических данных — определение оптических показателей анодно полученных плёнок из TiO_2 277
J. R. Chopra, A. N. Pandey, S P. Sharma and R. K. Agarwal: Infrared Studies of Some Selenocyanato Complexes of Oxozirconium(IV) with O and No Donor Ligands 283
A. K. Srivastava, M. Srivastava and R. K. Agarwal: Complexes of Oxozirconium(IV) Perchlorate, Nitrate and Thiocyanate with Some Heterocyclic Bases 429

PRELIMINARY COMMUNICATIONS

GENERAL AND THEORETICAL CHEMISTRY

S. Uršić: Ferrocenylalkyl Carbocations. II. Contribution to the Problem of the Structure of Ferrocenylmethyl Carbocation 305

APPENDIX

Book Reviews (in Croatian) *A1, A19*
Minutes of the Meeting of the Croatian Chemical Society (in Croatian) . *A11*
Meeting of the Croatian Chemical Society (in Croatian) *A21*
Announcements *C1, C3*
Errata *C5*
Acknowledgement to Referees *C7*
Contents: *Croatica Chemica Acta, Vol.* **55** I
Index VIII

SADRŽAJ

ORIGINALNI ZNANSTVENI RADOVI

OPĆA I TEORIJSKA KEMIJA

R. Blinc: Mehki načini nihanja v feroelektrikih z vodikovimi vezmi . . . 7

S. Bratos: Oblika nihajnih trakov van der Waalsovih tekočin in tekočin z vodikovimi vezmi. Primerjava mehanizmov, ki vplivajo na njihovo obliko 15

C. A. Chatzidimitriou-Dreismann in E. Lipert: Statistični opis dinamičnih procesov molekul v tekočinah. Uporaba absorpcijske spektroskopije v daljnem infrardečem območju 23

Lj. Golič in L. Leban: Kristalna struktura amonijevega hidrogen meleata . . 41

E. Grech, Z. Malarski in L. Sobczyk: Vodikove vezi $(NH\cdots N)^+$ v kristalih soli mono-aza in diaza-biciklo[2,2,2]-oktana 47

P. L. Huyskens in G. G. Siegel: Dipolni momenti vodikovo vezanih kompleksov 55

R. Janoschek: Elektrostatski model v teoriji vodikove vezi 75

M. Kertesz, J. Koller in A. Ažman: Uporaba formalizma vmesnih ekscitonoc na molekulski verigi H_2 85

A. Kivinen, H. Auvinen, J. Huuskonen in K. Väkiparta: Vodikove vezi v farmacevtskih substancah. Prvi del 2,3,4,5-tetrajodo-, tetrabromo- in tetrakloropirol kot srednje močni protonski donorji 91

J. Kroon in J. A. Kanters: Kalijev hidrogen tartronat: dva osnovna tipa H-vezi 99

J.-M. Leclercq, P. Dupuis in C. Sándorfy: Možnost dvojnega potencialnega minimuma v protonskem mostu v vidnih pigmentih in bakteriorodopsinu 105

D. Lucas, L. J. Allamandola in G. C. Pimentel: Infrardeči spektri simetrično izoliranih aduktov med nitrozilovimi halogenidi in vodikovimi halogenidi ali halogeni 121

Y. Maréchal: Kvantitativna infrardeča spektroskopija H-vezi intenzitete v_s trakov 129

D. J. Millen: Mikrovalne spektroskopske raziskave vodikovo vezanih dimerov in usmerjeni značaj vodikovih vezi 133

A. Novak: Medmolekulska nihanja vodikove vezi 147

I. Olovsson: Elektronska gostota vodikove vezi 171

W. J. Orville-Thomas in H. Ratajczak: Matrična izolacija in študij vode z metodo molekulskih orbital 191

C. N. R. Rao, S. Ganguly in H. R. Swamy: Študij faznih prehodov v organskih molekulskih kristalih in dikarbonskih kislinah z vibracijsko spektroskopijo 207

N. D. Sokolov: Nihajne sklopitve v molekulskih kompleksih 223

J. C. Speakman in K. W. Muir: Bazične soli z zelo kratkimi vodikovimi vezmi; kristalna struktura adukta α-pikolin-*N*-oksid-hemivodikovklorid trihidrat (Dunlopova sol) 233

E. Spinner: Vibracijska spektroskopija spojin z zelo kratkimi vodikovimi vezmi. Vodni bisformatni ion. Primerjava z dvemi solni v kristaliničnem stanju in nekaj opomb na široke, zvezne vibracijske trakove OH 245

K. S. Siddiqi, P. Khan, S. Khan, M. R. H. Siddiqi i S. A. A. Zaidi: Kompleksi α-naftilamin-ditiokarbamata s prijelaznim metalima 271

M. B. Todorović, I. J. Gal, I. D. Paligorić i V. M. Radak: Samodifuzija Cd^{++} jona u hidratisanom CdX zeolitu 287

T. M. Šuranji i N. B. Milić: Hidroliza torijum(IV)-jona u magnezijum kalcijum, stroncijum i barijum hloridnim sredinama 295

I. Gutman: Topološka svojstva benzenoidnih sustava. X. Bilješka o jednom grafovskom polinomu Knopa i Trinajstića 309

Z. Kralj, N. Paulić, N. Raos i Vl. Simeon: Kompleksi bakra(II) i kobalta(II) s L-treoninom i L-allo-treoninom: potenciometrijska i spektroskopska (CD) istraživanja 337

B. Džonova-Jerman-Blažić i N. Trinajstić: Primjena modela reduciranog grafa na prebrojavanje Kekuléovih struktura i konjugiranih krugova benzenoidnih ugljikovodika 347

I. Gutman: Broj Kekuléovih struktura konjugiranih sustava koji sadrže linearni poliacenski fragment 371

I. Gutman i B. Mohar: Neka zapažanja o topološkoj rezonancijskoj energiji benzenoidnih ugljikovodika 375

S. Heimer i Dj. Težak: Taloženje taninske kiseline s tritonom T-X-705 . . 383

N. Pavković, M. Marković i B. Kojić-Prodić: Spontano taloženje u sistemu $UO_2(NO_3)_2$—KOH—H_3PO_4—H_2O 395

N. Pavković, M. Marković i B. Kojić-Prodić: Identifikacija i karakterizacija alkalijskih uranil(2+) fosfata 407

T. A. Mastryukova, A. B. Uryupin, M. I. Kabachnik, M. Orlov i D. Jeremić: Reakcija difenildiazometana sa fosfor monotiokiselinama 413

KEMIJSKA SINTEZA

J. J. Herak, M. Kovačević i B. Gašpert: Proširenje prstena tiazolidina i nukleofilna supstitucija *N*-acil derivata 6-tia-3,8-diazabiciklo[3.2.1] oktan-2-pma 327

ANALITIČKA KEMIJA

S. Turina i N. Blažević: Određivanje srebra u aluminiju tankoslojnom kromatografijom 315

S. Luterotti i V. Grdinić: Sakupljanje tragova kadmij(II)iona na 2(3)-alanin-*N*,*N*-diocteno kiseloj celulozi 321

ORGANSKA SINTEZA

G. Snatzke, A. Konowal, A. Sabljić, N. Blažević i V. Šunjić: Cirkularni dihroizam optički aktivnih 1,4-benzodiazepina 435

V. Škarić i V. Turjak-Zebić: Geometrijski izomeri u serijama 2-amino-(2-hidroksi)-cikloheksan-1,3-, 1,4-, -1,5- i 1,6 dikarboksilnih kiselina . . 457

BILJEŠKE

OPĆA I TEORIJSKA KEMIJA

Lj. D. Arsov, M. Froelicher, M. Froment i A. Hugot Le-Goff: Elipsometrijsko određivanje optičkih indeksa filmova TiO_2 277

J. R. Chopra, A. N. Pandey, S. P. Sharma i R. K. Agarwal: IR studij oksocirkonij(IV) selenocijanato kompleksa s O i N donorskim ligandima . . 287

A. K. Srivastava, M. Srivastava i R. K. Agarwal: Kompleksi oksocirkonij(IV)-perklorata, -nitrata i -tiocijanata s nekima heterocikličnim bazama . 429

PRETHODNA SAOPĆENJA

OPĆA I TEORIJSKA KEMIJA

S. Uršić: Ferocenilalkil karbokationi. II. Doprinos problemu strukture ferocenilmetil karbokationa 305

PRILOZI

Prikazi knjiga *A1, A19*
Izvanredna godišnja skupština Hrvatskoga kemijskog društva *A11*
Godišnja skupština Hrvatskoga kemijskog društva *A21*
Obavijesti *C1, C3*
Errata *C5*
Zahvala recenzentima *C7*
Sadržaj: *Croatica Chemica Acta*, **Vol. 55** I
Indeks VIII